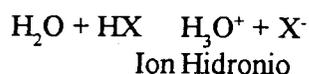


La Estructura del Agua Protonada

Por: Dr. Norberto Farfán García
Departamento de Química

¿Alguna vez te has preguntado que estructura tiene el ion hidronio $[H_3O]^+$? En el tiempo que tengo como profesora jamás me ha cuestionado ningún estudiante acerca de cómo se puede demostrar que este ion existe, todos lo aceptan sin vacilaciones. Aquí pretendo ilustrar como se puede demostrar la existencia del ion hidronio por medio de la Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de oxígeno-17.

Normalmente se plantea a los estudiantes que un ácido en agua conduce al ion hidronio (1). Hantzsch¹ y Goldschmidt² fueron los primeros en postular la existencia del agua protonada en 1907 y no fue hasta 16 años más tarde, con la teoría ácido-base propuesta por Bronsted^{3,4} y Lowry^{5,6} cuando se establece que un ácido es una especie que cede un protón (HX), es decir, acepta un par de electrones; por lo tanto el agua es una base porque acepta un protón o cede un par de electrones del oxígeno.



La Resonancia Magnética Nuclear es una herramienta analítica muy útil para los químicos, ya que permite estudiar casi todos los núcleos de la tabla Periódica y la información que se obtiene es muy valiosa. El análisis consiste en someter una solución

del compuesto a un campo magnético e irradiar la muestra, a una frecuencia característica de cada núcleo lo que ocasiona una absorción de energía, de esta manera se obtiene una serie de señales que pueden interpretarse para obtener información de la estructura molecular.

La RMN sólo puede aplicarse a núcleos que poseen número de masa o número de protones impar o ambos impares. Así, el isótopo 17 del oxígeno tiene un número de protones de 8, pero el número de masa es non, por lo tanto es el único de los tres posibles isótopos (¹⁶O, ¹⁷O, ¹⁸O) que cumple con la condición. Desafortunadamente este isótopo sólo se encuentra en una abundancia natural muy pequeña (0.037%), lo que hace que en RMN no sea fácil de detectar⁷.

Las señales que se obtienen por medio de la RMN se representan por dos parámetros: uno es el desplazamiento químico (δ) y éste se mide con relación a una referencia, en unidades de partes por millón (ppm), el cual proporciona información del tipo de átomos al que se encuentra unido el núcleo en estudio. En algunos casos se observa que las señales se encuentran divididas o presentan multiplicidad, esto nos permite obtener información acerca del número de núcleos con los que interacciona. De esta

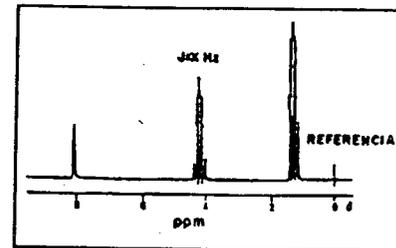


Figura 1. Espectro de RMN de 1H del Etanol donde se muestran los parámetros: desplazamientos químicos (δ) y constante de acoplamiento (J).

manera podemos observar en los espectros de RMN señales dobles, triples, cuádruples y en algunos casos señales más complejas. A la separación entre las señales se le denomina constante de acoplamiento y se representa como J , ésta se mide por la separación entre los picos de la señal y se describe en unidades de frecuencia de Hertz (Hz). La multiplicidad que presentan las señales se debe a la existencia de acoplamientos entre los espines nucleares de átomos vecinos (acoplamientos espín-espín). En la figura 1 se muestra el espectro de RMN de

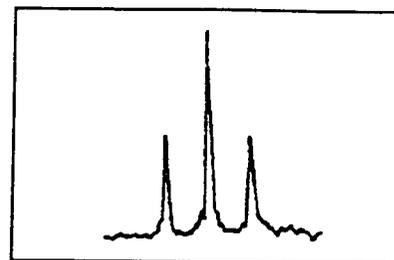


Figura 2. Espectro de RMN de ^{17}O de agua (H_2O) temperatura ambiente.